TITLE:

ANDERSON TIGHT BINDING MODELのスペクトルの局所的な揺らぎ(ポスター・セッション・プログラム,第3回『非平衡系の統計物理』シンポジウム(その2),研究会報告)

AUTHOR(S):

南, 就将

CITATION:

南, 就将. ANDERSON TIGHT BINDING MODELのスペクトルの局所的な揺らぎ(ポスター・セッション・プログラム,第3回『非平衡系の統計物理』シンポジウム(その2),研究会報告). 物性研究 1996, 66(2): 349-358

ISSUE DATE:

1996-05-20

URL:

http://hdl.handle.net/2433/95727

RIGHT:

京都大学学術情報リポジトリ
KURENAI 紅
Kyoto University Research Information Repository

ANDERSON TIGHT BINDING MODEL のスペクトルの局所的な揺らぎ

筑波大学数学系　南　就将

1. 序

本稿では表題に関する筆者自身の結果を述べるとともに，Anderson 局在をめぐる最近の数理物理の成果を簡単に紹介したい．ランダム系の具体的なモデルを "数学解析 (mathematical analysis)" という手法により分析した実験報告としてお読みいただければ幸いである．従って数学的な証明の詳細については他の文献にゆずることとし，ここでは一切省略する．1990 年ころまでの研究成果は [C-L], [F-P] にほぼ集大成されている．それ以後の成果については文中で適宜紹介していくつもりである．

整数値の座標を持つ d-次元の点の全体（d-次元格子）を $\mathbf{Z}^d$ として，$\mathbf{Z}^d$ の各点 x に確率変数 V_x が対応しているとする．$V = \{V_x\}_x$ はランダムなポテンシアルを表す．基本的な仮定として，各 V_x は互いに独立で，同じ確率分布を持ち，しかもその分布は有界な密度関数を持つとする．即ち

$$\sup_{-\infty<v<\infty} \rho(v) = \|\rho\|_\infty < \infty \tag{1.1}$$

および

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(v)dv = 1 \tag{1.2}$$

を満たす関数 $\rho(v) \geq 0$ が存在して，任意個数の格子点 x_j , $j = 1, \ldots, N$ を取るとき

$$\mathbf{P}(V_{x_j} \in dv_j,\ j = 1, \ldots, N) = \prod_{j=1}^{N} \rho(v_j)dv_j \tag{1.3}$$

が成り立つとする．但し $\mathbf{P}$ はランダムポテンシアル V 全体の確率法則である．いいかえると，$V=\{V_x\}_x$ のあらゆる実現の全体をΩ と書くとき，$\mathbf{P}$ は Ω 上の確率測度である．さて各 $V\in\Omega$ に対して，$\mathbf{Z}^d$ 上の関数 $u(x)$ に作用する演算子（ハミルトニアン）

$$(H(V)u)(x) = -\sum_y (u(y)-u(x)) + V(x)u(x) \tag{1.4}$$

略記して

$$H(V) = -\Delta + V \tag{1.5}$$

を対応させる．(1.4) の和は x の最近接格子点 y 即ち

$$y = x \pm e_j \ , \ (e_j)^{(i)} = \delta_{ij} \tag{1.6}$$

という形の y に渡る．Δ は離散化された Laplacian である．こうして定義されたハミルトニアンのアンサンブル $\{H(V); V\in\Omega\}$ と，V の確率法則 $\mathbf{P}$ との組をここでは Anderson tight binding model と呼ぶことにする．

2.(Integrated) density of states

$[1,L]^d$ という形の $\mathbf{Z}^d$ の部分集合およびその平行移動を $\mathbf{Z}^d$ の hypercube と呼ぶ．$\chi_\Lambda(x)$ は $x\in\Lambda$, $x\in\Lambda^c$ に応じて値 1 , 0 をとる $\mathbf{Z}^d$ 上の関数（Λ の定義関数）とし，

$$H_\Lambda(V) = \chi_\Lambda H(V)\chi_\Lambda \tag{2.1}$$

により $H(V)$ の hypercube Λ への制限を定義する．これは $H(V)$ に対する固有値問題を Dirichlet 境界条件の下で考えることに相当する．空間が離散的だから $H(V)$ は有限次元のエルミート行列にすぎない.（そのサイズは Λ に含まれる点の個数 $|\Lambda|$.）その固有値を大きさの順に

$$E_1(\Lambda) \le \cdots \le E_{|\Lambda|}(\Lambda) \tag{2.2}$$

とする．

さて Λ を大きくしていくと，決まったエネルギー区間に入る固有値の数はほぼ $|\Lambda|$ に比例して増えてゆくことが証明される．即ち $H(V)$ の固有値のうち一定値 E を越えないものの個数を

(2.3) $$N_\Lambda(E) = \sharp\{j;\ E_j(\Lambda) \le E\}$$

とすると，確率1で極限値

(2.4) $$N(E) = \lim_{\Lambda \uparrow \mathbf{Z}^d} \frac{1}{|\Lambda|} N_\Lambda(E)$$

がすべての $E \in \mathbf{R}$ に対して存在する．ここで $N_\Lambda(E)$ はランダムポテンシアル V の実現によって変わる量だが，極限の $N(E)$ は E だけの関数である（[C-L],[P-F] 参照）．この $N(E)$ のことを integrated density of states，略して IDS という．実は IDS の存在自体は V がエルゴード的な確率場をなす限り常に保証され（[C-L],[P-F]），しかも $N(E)$ は連続関数となる（[D-S]）．特に $V = \{V_x\}$ が独立同分布の確率変数族で，各 V_x の分布が (1.1), (1.2) を満たす密度関数により与えられるならば，実は $N(E)$ 自身がある密度関数 $n(E)$ により

(2.5) $$N(E) = \int_{-\infty}^{E} n(E')dE'$$

と書かれ，しかも

(2.6) $$n(E') \le \|\rho\|_\infty$$

となることが簡単に証明される（[S]）．この $n(E)$ が本来の density of states である．

さて，我々の仮定 (1.1), (1.2) だけからは $n(E)$ が (2.6) を満たす有界関数であることしかわからない．従って

(2.7) $$\frac{dN(E)}{dE} = n(E)$$

はルベーグ測度について殆どすべての E に対して成立することはわかるが，例外点は存在しうる．さらに進んで $n(E)$ の連続性，微分可能性，解析性などを証明するのは難しい問題であって，V_x の確率分布に対してもより詳しい技術的な条件を課す必要がある．この問題については A.Klein など（[K1] 参照）による詳しい研究がある．

3. ANDERSON 局在

不規則なポテンシアル場の中で電子が局在し得ることを最初に指摘したのは Anderson であろう（[A]）．この予想は特に空間次元 $d = 1$ の場合に Mott, Borland 等により裏ずけられ，また松田，石井，Pastur（[I], [P] 参照）はランダムな行列の積に関する Furstenberg の定理を transfer matrix に適用して，一次元不規則系に対する数学的に厳密な理論を展開したが，局在状態の存在を数学的に確証するには至らなかった．解析的に極めて微妙な問題が克服されねばならなかったのである．この困難を最初に乗り越えたのは旧ソ連の Goldsheidt, Molchanov, Pastur の 3 人であった（[G-M-P], [Mo1]）．彼らの論文はたいへん複雑なものだったが，後に Carmona, 小谷真一等により証明の簡略化がなされた（[C], [Ko]）．一方，空間次元 $d > 1$ なる tight binding model に対しては，Fröhlich と Spencer が最初に本格的な解析を行い，部分的な結果を得た（[F-S]）．その後これを小谷（[K]）による技術的なアイデイアと組み合わせて Anderson 局在の最終的な証明が得られた（[D-L-S],[S-W]）．また [F-S] の解析を徹底させることによっても局在の存在が示されている（[F-M-S-S]）．さらにその後 von Dreifus と Klein（[vD-K]）続いて Aizenman と Molchanov（[A-M]）によって初等的な証明が考案され，現在では Anderson 局在は数学的にもかなりよくわかっていると言ってよい．

ここで ”Anderson 局在” の数学的な定義を与えておく．1 節で導入したランダムなハミルトニアン $H(V)$ は $\mathbf{Z}^d$ 上の関数 $u(x)$ に作用するが，その定義域を

$$\ell^2(\mathbf{Z}^d) = \{u;\ \sum_{x\in\mathbf{Z}^d} |u(x)|^2 < +\infty\} \tag{3.1}$$

の部分空間

$$D(V) = \{u \in \ell^2(\mathbf{Z}^d);\ H(V)u \in \ell^2(\mathbf{Z}^d)\} \tag{3.2}$$

に限ると，$H(V)$ は自己共役（エルミート）作用素になる．あるエネルギー区間 I において $H(V)$ のスペクトルが点スペクトル（固有値）–典型的には I で dense な集合をなすが–のみからなり，対応する固有関数が遠方で指数関数的に減衰するならば，I において Anderson 局在が起きているというのである．

一般に自己共役作用素のスペクトルは点スペクトルと連続スペクトルとに分解される．連続スペクトルはさらに絶対連続スペクトルと特異連続スペクトルとに分解されるが，後者の特異連続スペクトルというのは解析的にはなかなかつかまえにくいものである．先に述べた松田，石井，Pastur の結果は実は一次元の不規則系は絶対連続スペクトルを持たないというものだったのである．この結果は一次元系における Anderson 局在の存在を強く示唆するものではあったが，特異連続スペクトルの可能性を数学的に排除するのが当時は困難だったのである．その後考案された証明では Hamiltonian $H(V)$ の一般化固有関数というものを考え，それが指数的に減衰することを証明することにより一挙に Anderson 局在の証明を得るのである．

tight binding model $H(V)$ に対する Anderson 局在について現在までに知られている結果をまとめると次のようになる．

定理. *(i)* $d=1$ かつある $\delta=1$ に対して $\int |v|^\delta \rho(v)dv < \infty$ となるならば，全エネルギー区間に渡って *Anderson* 局在が起きている．即ち $H(V)$ は連続スペクトルを持たず固有関数はすべて指数的に減衰する．

(ii) $d>1$ ならば次元のみによる定数 $K(d)>0$ が存在して

$$\|\rho\|_\infty^{-1} + |E| > K(d)$$

なるエネルギー区間において *Anderson* 局在が起きる．即ち $\|\rho\|_\infty$ が大ならば全エネルギー区間に渡って *Anderson* 局在が起き，そうでなければ充分大きなエネルギーの領域において *Anderson* 局在が起きる．

”Anderson 局在のスケーリング理論”によれば $K(2) = 0$ ，さらに $d \geq 3$ ならば $K(d) > 0$ となることが予想される．即ち2次元系に対しては disorder の大きさに関わらず全エネルギー領域で Anderson 局在が起き，3次元以上の系では disorder が小さく，$|E|$ も小さければ非局在状態が現れるはずであるが（Anderson 転移），これを確証する数学的な結果は全くない．

一方 $\mathbf{Z}^d$ を Bethe lattice でおきかえた場合には実際に Anderson 転移が起きることを A.Klein が最近証明した（[K2]）．

4. スペクトルの局所的揺らぎ

2節で解説した IDS は $H(V)$ の hypercubes Λ への制限 $H_\Lambda(V)$ のスペクトルの $\Lambda \uparrow \mathbf{Z}^d$ における極限挙動の第一近似を与えるものといえる．エネルギー値 E において (2.7) が成り立つとき，E の近傍における $H(V)$ の固有値の平均間隔は $\{|\Lambda|n(E)\}^{-1}$ の程度である．そこで次の問題として，E の近傍における固有値の ”平均のまわりの揺らぎ”を考えるのは自然であろう．即ち $H_\Lambda(V)$ の固有値が (2.2) で与えられるとき，それらをスケールしなおしたもの：

$$\xi_j(\Lambda; E) = |\Lambda|(E_j(\Lambda) - E)\ j \geq 1 \tag{4.1}$$

の $\Lambda \uparrow \mathbf{Z}^d$ における極限挙動を考えるのである．さらに，その極限挙動と3節に述べた Anderson 局在がどう関係してくるかに興味がある．

この種の問題は Molchanov（[Mo2]）が一次元のランダムな Schrödinger 作用素

$$H = -\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\ ,\ -\infty < x < +\infty \tag{4.2}$$

について考察した．ここで $\{V(x); -\infty < x < +\infty\}$ は非常に強い混合性を持つ確率過程である．H を区間 $\Lambda = [-L, L]$ に（Dirichlet 境界条件の下に）制限して考えると（それを H_Λ とする），離散的な固有値の列

$$0 < E_1(\Lambda) < E_2(\Lambda) < \cdots \tag{4.3}$$

が得られる．$L \to \infty$ とするとき (2.3), (2.4) と同様に integrated density of states $N(E)$ が得られるが，Molchanov は $\{V(x)\}$ として非常に特殊なものを考えているので，実際は滑らかな $n(E)$ が存在して (2.7) がすべての $E > 0$ において成立する．さて H_Λ の固有値 (4.3) を (4.1) に従ってスケールし直す．I が区間のとき

$$\xi_\Lambda(I) = \sharp\{j \geq 1\ ;\ \xi_j(\Lambda; E) \in I\} \tag{4.4}$$

とおく．Molchanov は次のことを示した：区間

$$I_L^j = (E + \frac{a_j}{2L}, E + \frac{b_j}{2L})\ ,\ j = 1, \ldots, n \tag{4.5}$$

は互いに重なり合わないとする．このとき次が成立する．

$$\begin{aligned} &\lim_{L\to\infty} \mathbf{P}(\xi_\Lambda(I_L^j) = k_j,\ j = 1, \ldots, n) \\ &= \prod_{j=1}^{n} e^{-n(E)(b_j - a_j)} \frac{\{n(E)(b_j - a_j)\}^{k_j}}{k_j!}\ . \end{aligned} \tag{4.6}$$

即ち $L \to \infty$ の極限において $\xi_\Lambda(I_L^j)$, $j = 1, \ldots, n$ は独立な Posson 分布にしたがう．いいかえると $L \to \infty$ の極限においては E の近傍にあるエネルギー準位の間には統計的な相関がなくなる．

Molchanov の論文は手法的には [G-M-P], [Mo1] の延長上にあるもので，その議論は極めて複雑である．著者 Molchanov 自身以外に読み通した人がいるのかどうか疑問に思われる程であるが，証明の背後にある直感的なアイデイアを読み取るのは容易である．(詳

しくは筆者の解説記事 [Mi1] も参照されたい.）それによると (4.6) のような Poisson 分布が得られる背景には Anderson 局在が深く関わっていることがわかる. 一方 3 節で説明したように tight binding model に対する Anderson 局在についてはかなり理解が進んでいるといえる. その成果を用いて Molchanov の美しい結果にもっと簡明な証明を与えられないかというのは自然な問題であろう. 筆者は 1 節に記述した $\mathbf{Z}^d$ 上の tight binding model に対して Molchanov と同様の結果を単純な証明により得ることに成功した. 以下その結果を述べて本稿を終えることにする.

空間次元 d , ポテンシアルの分布密度 $\rho(v)$, および $\xi_j(\Lambda;E)$ の定義にあらわれる ((4.1) を見よ) E に対して次のような条件をおく：

(1) $\rho(v)$ は (1.1) を満たし, E において (2.7) が成立.

(2) $d=1$ のときはある $\delta>0$ に対して

$$\int_{-\infty}^{\infty}|v|^{\delta}\rho(v)dv<\infty$$

が成り立つとする.

(3) $d>1$ のときは $\|\rho\|_{\infty}^{-1}+|E|$ が充分大きいとする.

定理 ([Mi2]). $\xi_j(\Lambda;E)$, $\xi_\Lambda(I)$ を *(4.1), (4.4)* に従って定義すると, 上の仮定の下に

$$\begin{aligned}&\lim_{L\to\infty}\mathbf{P}(\xi_\Lambda(I_L^j)=k_j,\ j=1,\dots,n)\\&=\prod_{j=1}^{n}e^{-n(E)(b_j-a_j)}\frac{\{n(E)(b_j-a_j)\}^{k_j}}{k_j!}\ .\end{aligned}$$

但し

$$I_L^j=(E+\frac{a_j}{|\Lambda|},E+\frac{b_j}{|\Lambda|})\ ,\ j=1,\dots,n\ ;\ \Lambda=[1,L]^d\ .$$

参考文献

[A] Anderson, Ph.: Absences of diffusion in certain random lattices. Phys. Rev. **109**, 1492–1505(1958)

[C] Carmona,R.: Exponential localization in onedimensional disordered systems. Duke Mathemat ical J. **49**, 191–213(1982)

[C-L] Carmona, R., Lacroix, J.: Spectral theory of random Schrödinger operators. Boston: Birkhäuser 1990

[D-L-S] Delyon,F., Lévy,Y., Souillard,B.: Anderson localoization for multidimensional systems at large disorder or low energy. Commun. Math. Phys. **100**, 463–470(1985)

[D-S] Delyon, F., Souillard, B.: Remark on the continuity of the density os states of ergodic finite difference operators. Commun. Math. Phys. **94**, 289–291(1984)

[F-M-S-S] Fröhlich,J., Martinelli,F., Scoppola,E., Spencer,T.: A constructive proof of localization in Anderson tight binding model. Commun. Math. Phys. **101**,21–46(1985)

[F-S] Fröhlich,J., Spencer,T.: Absence of diffusion in the Anderson tight binding model for large disorder or low energy. Commun. Math. Phys. **88**, 151–184(1983)

[G-M-P] Goldsheidt, I.Ya., Molchanov, S.A., Pastur, L.A.: A pure point spectrum of the stochastic one-dimensional Schrödinger operator. Funct. Anal. Appl. **11**, 1–11(1977)

[I] Ishii,K.: Localization of eigenstates and transport phenomena in the one dimensional disordered system. Prog. Theor. Phys., Suppl. **53**, 77–138(1973)

[K1] Klein, A.: The supersymmetric replica trick and smoothness of the density of states for random Schrödinger operators. Proc. Symp. Pure Math. **51**, 315–331(1990)

[K2] Klein,A.: The Anderson metal-insulator transition on the Bethe lattice. preprint

[Ko] Kotani,S.: Lyapunov exponents and spectra for one-dimensional random Schrödinger operators. Proc. Conf. on Random Matrices and their Applications. Contemporary Math. **50**, 277–286(1986)

[Mi1] Minami,N.: 準位集積はなぜ起こるか？ 数理科学 **32-10**, 19–23(1994)

[Mi2] Local fluctuation of the spectrum of a multidimensional Anderson tight binding model. preprint

[Mo1] Molchanov, S.A.: The structure of eigenfunctions of one- dimensional unordered structure. Math. USSR, Izv. **12**, 69–101(1978)

[Mo2] Molchanov,S.A.: The local structure of the spectrum of the one-dimension Schrödinger operator. Commun. Math. Phys. **78**, 429–446(1981)

[P] Pastur,L.: Spectral properties of disordered sys tems in the one body approximation. Commun. Math. Phys. **75**, 167–196(1980)

[P-F] Pastur, L. Figotin, A.: Spectra of random and almost- periodic operators. Berlin, Heiderberg: Springer-Verlag 1992

[S] Spencer, T.:The Schrödinger opertor with a random potential. In: Osterwalder, K., Stora, R.(eds.) Critical phenomena, random system, gauge theories. Les Houches, Session XLIII, 1984, 895–943. Amsterdam: North-Holland 1986

[S-W] Simon,B., Wolff,,T.: Singular continuous spectrum under rank one perturbation and localization for random Hamiltonians. Comm. Pure Appl. Math. **39**, 75–90(1986)